

О ВОЗМОЖНОМ ВАРИАНТЕ УЧЕТА КОНЕЧНОЙ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВЕЩЕСТВА ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ

Ломаев И.Л.

Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск

e-mail: LomayevIL@yandex.ru

Несмотря на то, что диффузионные процессы в твердых телах изучаются уже более 100 лет ([1], [2]), до сих пор многие вопросы остаются нерешенными. Одним из основных парадоксов математической теории переноса, основанной на классическом законе Фика (или Фурье для случая теплопроводности), является возможность переноса массы (тепла) с бесконечно большой скоростью. Этот факт легко проиллюстрировать следующим. Рассмотрим простейшую краевую задачу для полубесконечной прямой $x \in [0, +\infty)$:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad c(0, t) = 1, \quad c(x, 0) = 0 \quad (1)$$

Это дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка параболического типа, решением которого является функция

$$c(x, t) = \operatorname{erfc}\left(x / 2\sqrt{Dt}\right) \quad (2)$$

Зафиксируем теперь поверхность с постоянной концентрацией $c(x, t) = c_s$. В общем случае скорость ее перемещения в пространстве определяется в каждой точке выражением:

$$w_s = -\frac{1}{|\nabla c|} \frac{\partial c}{\partial t} \quad (3)$$

Подставляя (2) в (3) для задачи (1) получим

$$w_s = \sqrt{D/t} \operatorname{erfc}^{-1}(c_s), \quad (4)$$

откуда видно, что при $c_s \rightarrow 0$ $w_s \rightarrow \infty$, т.е. скорость распространения малых концентраций бесконечно велика. Это утверждение не только не соответствует физической сущности явлений массопереноса, но и противоречит молекулярно-кинетическим представлениям о природе диффузии. Особенно остро данная проблема встает при исследовании диффузии в тонких пленках и в материалах с размером зерен $R \sim (10 \div 100)$ нм, поскольку классические уравнения диффузии в этом случае приводят к ситуации, в которой зерно мгновенно заполняется примесью во всем объеме, что, очевидно, не соответствует физической природе явления.

Попытки решить задачу диффузии с учетом конечности скорости массопереноса предпринимались неоднократно [1], однако в основном они сводились к получению гиперболического уравнения, в которое скорость распространения массы (теплоты) w_m входила бы явным образом. Надо, однако, отметить, что сам по себе параметр w_m плохо определим физически, и его введение в теорию представляет в основном качественный интерес, поскольку количественные оценки затруднительны.

В 60-ые годы прошлого столетия появились работы (например, [3]) в которых были получены более общие результаты, связанные с конечной скоростью переноса субстанции (массы или теплоты), выведены интегродифференциальные уравнения для трехмерного случая с учетом конечной скорости и сформулирована общая нелинейная задача переноса. Однако применение подобных теорий на практике приводит к большим математическим трудностям.

В данной работе эта задача решается в рамках атомных представлений о природе диффузии. Показано, что задача диффузионного массопереноса в конденсированных средах должна ставиться как краевая задача с подвижной границей разрыва концентрации. Рассмотрены задачи с постоянным и мгновенным источниками, их характерные решения приведены на рис. 1. Видно, что в этом случае распределение диффузанта в пространстве может существенно отличаться от соответствующего решению задачи в классической постановке (см. уравнение (1), решения изображены пунктирной линией). Эффективно это приводит к увеличению коэффициента диффузии в приграничной области. В такой постановке решения диффузионной задачи физически обоснованы и всегда имеют ограниченную скорость распространения.

Рассмотренный подход к постановке задачи диффузии может быть применен не только к твердым телам, но также к жидкостям, газам и в теории теплопроводности.

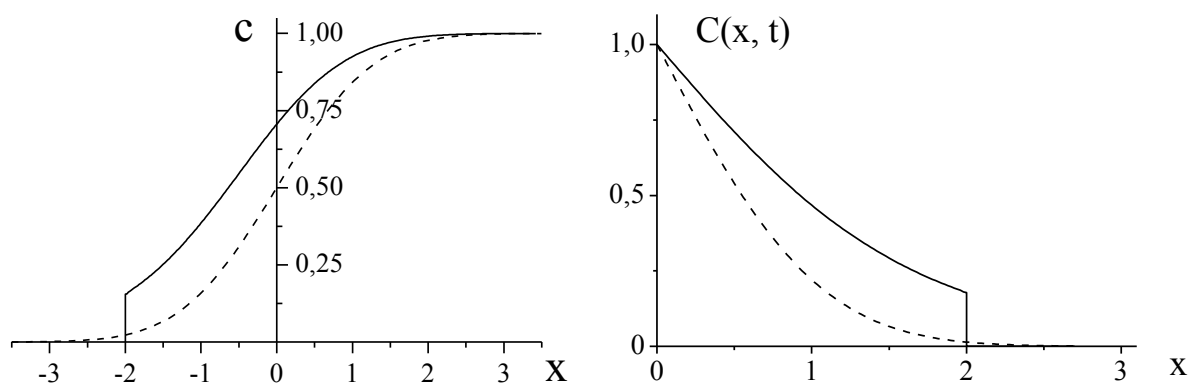


Рис. 1 Характерные решения краевой задачи с подвижной границей:
а) мгновенный источник, б) источник с постоянной концентрацией.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Лыков А.В. Тепломассообмен (справочник). М.: Энергия 1978.
- [2] Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. М.: Metallurgia
- [3] Толубинский Е.В. Исследования по теплопроводности. Минск: Наука и техника, 1967.

Работа поддержана проектом РФФИ Урал № 07-03-96011